

核の運動を考慮した多原子分子のための第一原理シミュレータの開発 2

Development of the first principles simulator

for polyatomic molecules considering nuclear dynamics 2

東大院工, °織茂 悠貴, 佐藤 健, 石川 顕一

Univ. Tokyo, °Yuki Orimo¹, Takeshi Sato, Kenichi L. Ishikawa

E-mail: ykormhk@atto.t.u-tokyo.ac.jp

高強度超短レーザーパルスによって誘起される電子や原子核のダイナミクスをアト秒・オングストロームスケールで高精度に制御・観測しようとする試みが盛んに行われている。我々は理論・数値計算からのアプローチとして time-dependent complete-active-space self-consistent field 法[1] や time-dependent occupation-restricted multiple-active-space 法[2]といった多配置波動関数理論を開発し、原子や分子の高精度な第一原理計算を実現してきた[3-5]。

これまで我々の計算対象のほとんどが核を空間に固定した原子や比較的小さい分子であったが、最近の実験では多原子分子の分子ダイナミクスを制御する試みなどが始まっており、電子と核のダイナミクスを扱える多原子分子の第一原理計算の実現が望まれている。しかし核ダイナミクスを考慮した第一原理計算は、局所的に高い空間分解能を必要とする核のクーロンポテンシャルの位置が時々刻々変化するため単純な離散化では莫大な計算コストがかかってしまう。この問題に対処するため、我々は核の動きに追従して高い解像度が必要な領域にのみ動的に細かいグリッドを生成する adaptive mesh refinement を用いた一電子系時間依存シュレディンガー方程式ソルバーの開発をしてきた[6]。本研究では、このソルバーを上述の多配置波動関数理論へ適用し、多電子系ソルバーへと発展させることが目的である。下図は開発したソルバーを用いて求めた水素分子イオンの基底状態(断面図)と動的に得られたグリッドである。電子密度が高い領域にグリッドが密集しており、効率的に波動関数を表現できていることが分かる。講演では多電子系の実装の詳細と実時間発展の計算結果について報告する予定である。

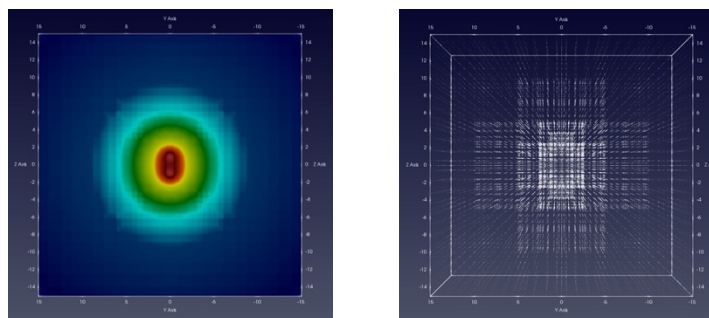


図1(左) 水素分子イオンの基底状態の断面図 (右) 水素分子イオンのクーロンポテンシャルに合わせ動的に生成されたグリッド

[1] T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **88**, 023402 (2013) [2] T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev.

A **91**, 023417 (2015) [3] R. Sawada, T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **93** 023434 (2016) [4] T.

Sato, *et al*, Phys. Rev. A **94** 023405 [5] Y. Orimo, T. Sato, K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **97**, 023423 (2018)

[6] 織茂悠貴, 佐藤健, 石川顕一, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会(2019)